Polarobreathers y el modelo de Peyrard-Bishop-Holstein

Jesús Cuevas Maraver

Grupo de Física No Lineal. Universidad de Sevilla
http://www.grupo.us.es/gfnl
http://www.personal.us.es/jcuevas

No Lineal 2008. Barcelona, 16 de Junio de 2008

Esquema de la charla

1. Breathers

Esquema de la charla

1. Breathers

2. Polarones

Esquema de la charla

1. Breathers
2. Polarones
3. Polarobreathers

Esquema de la charla

1. Breathers
2. Polarones
3. Polarobreathers
4. ¿Aplicaciones biológicas?
   - El modelo de Peyrard–Bishop
   - El modelo de Davydov–Scott

Esquema de la charla

1. Breathers
2. Polarones
3. Polarobreathers
4. ¿Aplicaciones biológicas?
   - El modelo de Peyrard–Bishop
   - El modelo de Davydov–Scott
5. Conclusiones

Esquema de la charla

Redes de osciladores

- En cierto grado de aproximación, la dinámica de un sólido se puede suponer similar a la de una red de osciladores.

Redes de osciladores

- En cierto grado de aproximación, la dinámica de un sólido se puede suponer similar a la de una red de osciladores.
- Interacciones armónicas → las perturbaciones se extienden por la red.

Redes de osciladores

- En cierto grado de aproximación, la dinámica de un sólido se puede suponer similar a la de una red de osciladores.
- Interacciones armónicas $\rightarrow$ las perturbaciones se extienden por la red.
- Modos de vibración no localizados $\leftrightarrow$ fonones.

Redes de osciladores no lineales

- Interacciones anarmónicas → las perturbaciones se pueden localizar.

Redes de osciladores no lineales

- Interacciones anarmónicas → las perturbaciones se pueden localizar.
- Coexisten modos de vibración localizados y no localizados.

Redes de osciladores no lineales

- Interacciones anarmónicas → las perturbaciones se pueden localizar.
- Coexisten modos de vibración localizados y no localizados.
- Modos de vibración localizados ↔ breathers (discretos).

La ecuación de Klein–Gordon no lineal discreta

- Los breathers discretos son solución de la ecuación de Klein–Gordon no lineal

$$\ddot{u}_n + V'(u_n) + k(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1}) = 0$$

- Consideramos el caso 1-d con potencial de interacción lineal a primeros vecinos.
- $V(u_n)$: Potencial on-site (o substrato). k: Constante de acoplo.

La ecuación de Klein–Gordon no lineal discreta

- Los breathers discretos son solución de la ecuación de Klein–Gordon no lineal

$$\ddot{u}_n + V'(u_n) + k(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1}) = 0$$

- Consideramos el caso 1-d con potencial de interacción lineal a primeros vecinos.
- $V(u_n)$: Potencial on-site (o substrato). k: Constante de acoplo.
- Breathers → Soluciones periódicas → Serie de Fourier

La ecuación de Klein–Gordon no lineal discreta

- Los breathers discretos son solución de la ecuación de Klein–Gordon no lineal

$$\ddot{u}_n + V'(u_n) + k(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1}) = 0$$

- Consideramos el caso 1-d con potencial de interacción lineal a primeros vecinos.
- $V(u_n)$: Potencial on-site (o substrato). k: Constante de acoplo.
- Breathers → Soluciones periódicas → Serie de Fourier

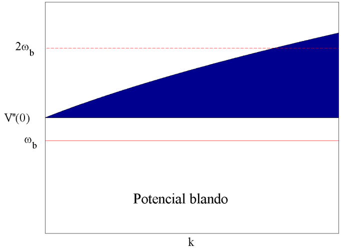
$$u_n(t) = \sum_k z_n^k \cos(k\omega_b t)$$

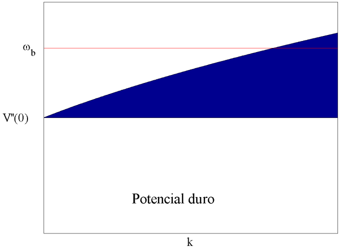
La ecuación de Klein–Gordon no lineal discreta

- Los breathers discretos son solución de la ecuación de Klein–Gordon no lineal
- Consideramos el caso 1-d con potencial de interacción lineal a primeros vecinos.
- $V(u_n)$: Potencial on-site (o substrato). k: Constante de acoplo.
- Breathers → Soluciones periódicas → Serie de Fourier

Existencia de breathers

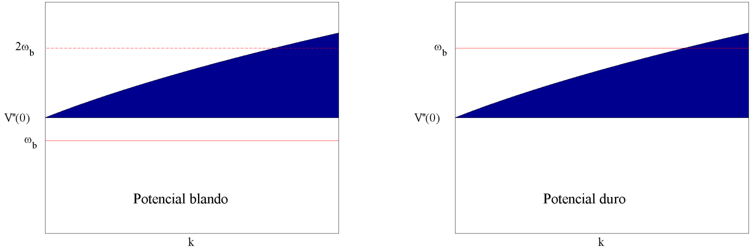
- Pueden existir breathers discretos en la ecuación anterior si se cumple [R.S. MacKay and S. Aubry. Nonlinearity 7 (1994) 1263]:
  - El potencial on-site es anarmónico.
  - Ningún múltiplo entero de ω_b coincide con la banda de fonones.





Existencia de breathers

- Pueden existir breathers discretos en la ecuación anterior si se cumple [R.S. MacKay and S. Aubry. Nonlinearity 7 (1994) 1263]:
  - El potencial on-site es anarmónico.
  - Ningún múltiplo entero de ω_b coincide con la banda de fonones.



- Ejemplo de potenciales anarmónicos:
  - Morse: $V(u) = D(\exp(-bu) - 1)^2$ (blando) $\rightarrow$ Puentes de H.
  - ϕ^4: $V(u) = x^2/2 \pm x^4/4$ (blando / duro).
  - sine-Gordon: $V(u) = 1 - \cos(x)$ (blando) $\rightarrow$ Péndulos.

La ecuación DNLS

- También existen breathers en la ecuación de Schödinger No Lineal Discreta:

$$i\dot{u}_n + |u_n|^2 u_n + J(u_{n+1} + u_{n-1}) = 0$$

La ecuación DNLS

- También existen breathers en la ecuación de Schödinger No Lineal Discreta:

$$\mathrm{i}\dot{u}_n + |u_n|^2 u_n + J(u_{n+1} + u_{n-1}) = 0$$

- Breathers → Series de Fourier con un sólo armónico (solitones discretos):

$$u_n(t) = z_n \exp(\mathrm{i}\omega_b t)$$

La ecuación DNLS

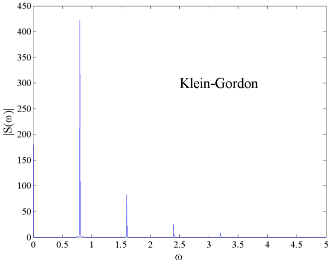
- También existen breathers en la ecuación de Schödinger No Lineal Discreta:

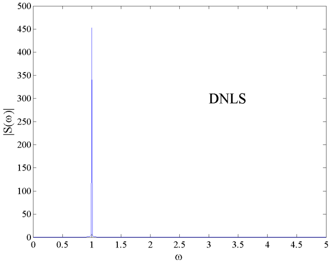
$$i\dot{u}_n + |u_n|^2 u_n + J(u_{n+1} + u_{n-1}) = 0$$

- Breathers → Series de Fourier con un sólo armónico (solitones discretos):

$$u_n(t) = z_n \exp(i\omega_b t)$$

- Espectros de Fourier:





Esquema de la charla

Definición de polarón

- Un electrón (hueco) libre penetra en el seno de un dieléctrico (cristal iónico, polímero):

Definición de polarón

- Un electrón (hueco) libre penetra en el seno de un dieléctrico (cristal iónico, polímero):
    - Los iones se mueven debido a la interacción coulombiana → Deformación (polarización) de la red.

Definición de polarón

- Un electrón (hueco) libre penetra en el seno de un dieléctrico (cristal iónico, polímero):
  - Los iones se mueven debido a la interacción coulombiana → Deformación (polarización) de la red.
  - Los iones desplazados producen un campo eléctrico que *autolocaliza* al electrón (hueco).

Definición de polarón

- Un electrón (hueco) libre penetra en el seno de un dieléctrico (cristal iónico, polímero):
  - Los iones se mueven debido a la interacción coulombiana $\rightarrow$ Deformación (polarización) de la red.
  - Los iones desplazados producen un campo eléctrico que *autolocaliza* al electrón (hueco).
  - Polarón $\leftrightarrow$ Electrón (hueco) + campo de deformación (polarización).

Definición de polarón

- Un electrón (hueco) libre penetra en el seno de un dieléctrico (cristal iónico, polímero):
  - Los iones se mueven debido a la interacción coulombiana $\rightarrow$ Deformación (polarización) de la red.
  - Los iones desplazados producen un campo eléctrico que *autolocaliza* al electrón (hueco).
  - Polarón $\leftrightarrow$ Electrón (hueco) + campo de deformación (polarización).
  - El polarón es una cuasi-partícula que surge por la interacción electrón–fonón [Landau, Pekar].

Definición de polarón

- Un electrón (hueco) libre penetra en el seno de un dieléctrico (cristal iónico, polímero):
  - Los iones se mueven debido a la interacción coulombiana → Deformación (polarización) de la red.
  - Los iones desplazados producen un campo eléctrico que *autolocaliza* al electrón (hueco).
  - Polarón ↔ Electrón (hueco) + campo de deformación (polarización).
  - El polarón es una cuasi-partícula que surge por la interacción electrón–fonón [Landau, Pekar].
- Aumento de conductividad eléctrica. Campo eléctrico → Conducción por polarones (el electrón arrastra la deformación de la red).

Definición de polarón

- Un electrón (hueco) libre penetra en el seno de un dieléctrico (cristal iónico, polímero):
  - Los iones se mueven debido a la interacción coulombiana $\rightarrow$ Deformación (polarización) de la red.
  - Los iones desplazados producen un campo eléctrico que *autolocaliza* al electrón (hueco).
  - Polarón $\leftrightarrow$ Electrón (hueco) + campo de deformación (polarización).
  - El polarón es una cuasi-partícula que surge por la interacción electrón–fonón [Landau, Pekar].
- Aumento de conductividad eléctrica. Campo eléctrico $\rightarrow$ Conducción por polarones (el electrón arrastra la deformación de la red).
- En general, un polarón describe a una partícula cuántica (electrón, hueco, excitón, vibrón) interaccionando con un entorno bosónico.

Tipos de polarones

- Polarón de Fröhlich:
  - Llamado también polarón de gran radio.
  - La interacción entre el electrón y la red es débil.
  - El tamaño de la región polarizada es mucho mayor que la celda unidad.
  - La red puede considerarse un continuo polarizado.

Tipos de polarones

- Polarón de Fröhlich:
  - Llamado también polarón de gran radio.
  - La interacción entre el electrón y la red es débil.
  - El tamaño de la región polarizada es mucho mayor que la celda unidad.
  - La red puede considerarse un continuo polarizado.
- Polarón de Holstein:
  - Llamado también polarón de radio pequeño.
  - La interacción entre el electrón y la red es fuerte.
  - El tamaño de la región polarizada es del orden de la celda unidad.
  - La red no puede aproximarse por un continuo.
  - Conducción por saltos (temperatura alta) o efecto túnel (temperatura baja).

Tipos de polarones

- Polarón de Fröhlich:
  - Llamado también polarón de gran radio.
  - La interacción entre el electrón y la red es débil.
  - El tamaño de la región polarizada es mucho mayor que la celda unidad.
  - La red puede considerarse un continuo polarizado.
- Polarón de Holstein:
  - Llamado también polarón de radio pequeño.
  - La interacción entre el electrón y la red es fuerte.
  - El tamaño de la región polarizada es del orden de la celda unidad.
  - La red no puede aproximarse por un continuo.
  - Conducción por saltos (temperatura alta) o efecto túnel (temperatura baja).

Modelo de Holstein anarmónico: Polarones

- Ecuaciones dinámicas para un modelo anarmónico [M.A. Fuentes *et al*. PRE 70 (2004) 025601(R)]:

$$\mathrm{i}\dot{\Psi}_n = -J(\Psi_{n+1} + \Psi_{n-1}) + \chi u_n \Psi_n$$
$$\ddot{u}_n + V'(u_n) + k(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = -\chi |\Psi_n|^2$$

(Ecuación DNLS+Klein–Gordon)

Modelo de Holstein anarmónico: Polarones

- Ecuaciones dinámicas para un modelo anarmónico [M.A. Fuentes *et al*. PRE 70 (2004) 025601(R)]:

$$\mathrm{i}\dot{\Psi}_n = -J(\Psi_{n+1} + \Psi_{n-1}) + \chi u_n \Psi_n$$
$$\ddot{u}_n + V'(u_n) + k(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = -\chi|\Psi_n|^2$$

(Ecuación DNLS+Klein–Gordon)

- Se obtiene mediante una aproximación semiclásica:
  - Tratamiento cuántico para el electrón y clásico para los fonones.
  - Válida para χ o J altos (gran número de fonones excitados).

Modelo de Holstein anarmónico: Polarones

- Ecuaciones dinámicas para un modelo anarmónico [M.A. Fuentes *et al*. PRE 70 (2004) 025601(R)]:

$$\mathrm{i}\dot{\Psi}_n = -J(\Psi_{n+1} + \Psi_{n-1}) + \chi u_n \Psi_n$$
$$\ddot{u}_n + V'(u_n) + k(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = -\chi|\Psi_n|^2$$

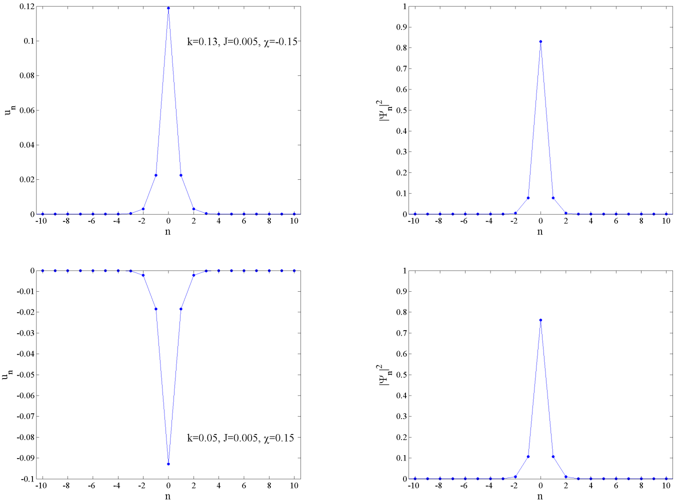
  (Ecuación DNLS+Klein–Gordon)

- Se obtiene mediante una aproximación semiclásica:
  - Tratamiento cuántico para el electrón y clásico para los fonones.
  - Válida para χ o J altos (gran número de fonones excitados).
- Soluciones estacionarias (polarones):

$$\Psi_n(t) = \phi_n \exp(\mathrm{i}\omega_e t), \qquad \dot{u}_n = \ddot{u}_n = 0.$$

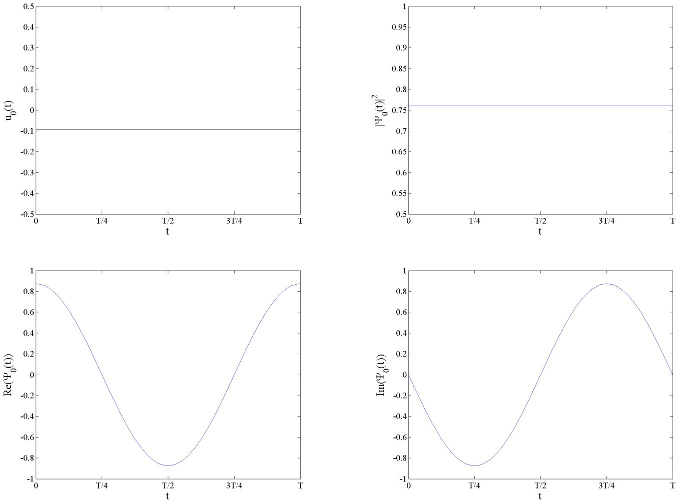
Modelo de Holstein anarmónico: Polarones

- Perfiles con potencial on–site de Morse:



Modelo de Holstein anarmónico: Polarones

- Evolución temporal de la partícula central ($T = 2\pi/\omega_e$):



Esquema de la charla

Modelo de Holstein anarmónico: Polarobreathers

- Polarobreather → Estado ligado entre electrón y breather (en lugar de fonón) [S. Aubry. Physica D 103 (1997) 201].

Modelo de Holstein anarmónico: Polarobreathers

- Polarobreather → Estado ligado entre electrón y breather (en lugar de fonón) [S. Aubry. Physica D 103 (1997) 201].
- La frecuencia de vibración electrónica (ω_e) es diferente de la del breather (ω_b).

Modelo de Holstein anarmónico: Polarobreathers

- Polarobreather → Estado ligado entre electrón y breather (en lugar de fonón) [S. Aubry. Physica D 103 (1997) 201].
- La frecuencia de vibración electrónica (ω_e) es diferente de la del breather (ω_b).
- Existe siempre que ningún múltiplo entero de ω_b coincida con la de los modos normales.

Modelo de Holstein anarmónico: Polarobreathers

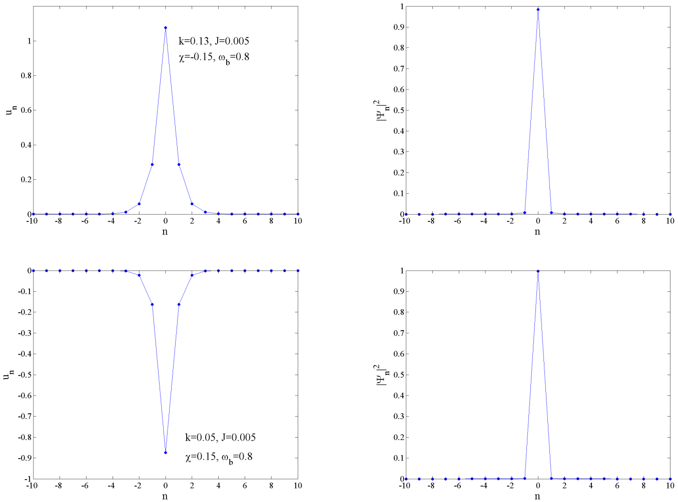
- Polarobreather → Estado ligado entre electrón y breather (en lugar de fonón) [S. Aubry. Physica D 103 (1997) 201].
- La frecuencia de vibración electrónica (ω_e) es diferente de la del breather (ω_b).
- Existe siempre que ningún múltiplo entero de ω_b coincida con la de los modos normales.
- En general, para que existan los polarobreathers, los acoplamientos k, J deben ser pequeños (polaron de Holstein).

Modelo de Holstein anarmónico: Polarobreathers

- Polarobreather → Estado ligado entre electrón y breather (en lugar de fonón) [S. Aubry. Physica D 103 (1997) 201].
- La frecuencia de vibración electrónica (ω_e) es diferente de la del breather (ω_b).
- Existe siempre que ningún múltiplo entero de ω_b coincida con la de los modos normales.
- En general, para que existan los polarobreathers, los acoplamientos k, J deben ser pequeños (polaron de Holstein).
- Espectros de Fourier:
  - Polarón → Un sólo armónico. Como breather en DNLS.
  - Polarobreather → Varios armónicos. Como breather en Klein–Gordon.

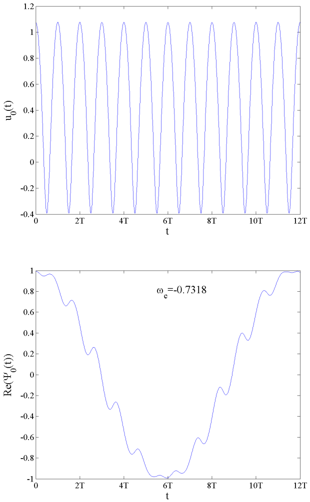
Modelo de Holstein anarmónico: Polarobreathers

- Perfiles con potencial de Morse:



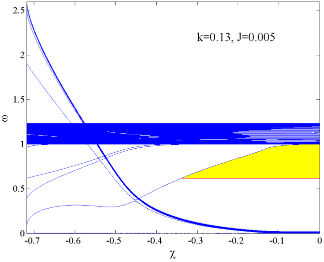
Modelo de Holstein anarmónico: Polarobreathers

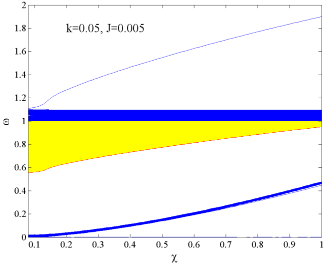
- Evolución temporal de la partícula central ($T = 2\pi/\omega_b$):



Modelo de Holstein anarmónico: Polarobreathers

- Rango de existencia [J. Cuevas, P.G. Kevrekidis, D.J. Frantzeskakis, A.R. Bishop. PRB 74 (2006) 064304]:





- Para $\chi < 0$, el rango de existencia se infiere del diagrama de modos normales. Los polarobreathers son estables.
- Para $\chi > 0$, existen bifurcaciones que restringen el rango de existencia. Los polarobreathes no son siempre estables.

Polarobreather vs polarón

Esquema de la charla

Esquema de la charla

El modelo de Peyrard–Bishop (ADN)

- Se introdujo para el estudio de la desnauralización del ADN [M. Peyrard, A.R. Bishop. PRL 62 (1989) 2755].

$$m\ddot{u}_n + V'(u_n) + k(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = 0$$

- u_n representan aperturas de la doble hélice, unidas por puentes de Hidrógeno.
- $V(u) = D(\exp(-bu) - 1)$: potencial de Morse (puentes de H).
- Breathers → responsables de la formación de burbujas; precursoras de desnaturalización.

El modelo de Peyrard–Bishop–Holstein

- Evidencia experimental de conducción eléctrica en ADN. [B. Giese *et al*. Nature 412 (2001) 318]

El modelo de Peyrard–Bishop–Holstein

- Evidencia experimental de conducción eléctrica en ADN. [B. Giese *et al.* Nature 412 (2001) 318]
- Hipótesis: Conducción debida a la existencia de polarones.

El modelo de Peyrard–Bishop–Holstein

- Evidencia experimental de conducción eléctrica en ADN. [B. Giese *et al.* Nature 412 (2001) 318]
- Hipótesis: Conducción debida a la existencia de polarones.
- Modelo para polarones en ADN → Peyrard–Bishop–Holstein.

$$
\begin{gathered}
i\hbar\dot{\Psi}_n = -J(\Psi_{n+1} + \Psi_{n-1}) + \chi u_n \Psi_n \\
m\ddot{u}_n + V'(u_n) + k(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = -\chi|\Psi_n|^2
\end{gathered}
$$

El modelo de Peyrard–Bishop–Holstein

- Evidencia experimental de conducción eléctrica en ADN. [B. Giese *et al.* Nature 412 (2001) 318]
- Hipótesis: Conducción debida a la existencia de polarones.
- Modelo para polarones en ADN → Peyrard–Bishop–Holstein.
- Cálculos químico-cuánticos: [D. Hennig, E.B. Starikov, J.F.R. Archilla, F. Palmero. JBP 30 (2004) 227]
  - En cadenas poly(dG)-poly(dC): $\chi = -0{,}090$ eV/Å
  - En cadenas poly(dA)-poly(dT): $\chi = 0{,}078$ eV/Å
- Otros parámetros: $m = 300$ uma; $D = 0{,}04$ eV; $b = 4{,}45$ Å^{-1}; $J = 0{,}1$ eV; $k = 0{,}04$ eV/Å^2. [P. Maniadis, G. Kalosakas, K.Ø. Rasmussen, A.R. Bishop. PRB 68 (2003) 174304]

El modelo de Peyrard–Bishop–Holstein

- Evidencia experimental de conducción eléctrica en ADN. [B. Giese *et al.* Nature 412 (2001) 318]
- Hipótesis: Conducción debida a la existencia de polarones.
- Modelo para polarones en ADN → Peyrard–Bishop–Holstein.
- Cálculos químico-cuánticos: [D. Hennig, E.B. Starikov, J.F.R. Archilla, F. Palmero. JBP 30 (2004) 227]
  - En cadenas poly(dG)-poly(dC): $\chi = -0{,}090$ eV/Å
  - En cadenas poly(dA)-poly(dT): $\chi = 0{,}078$ eV/Å
- Otros parámetros: $m = 300$ uma; $D = 0{,}04$ eV; $b = 4{,}45$ Å^{-1}; $J = 0{,}1$ eV; $k = 0{,}04$ eV/Å^2. [P. Maniadis, G. Kalosakas, K.Ø. Rasmussen, A.R. Bishop. PRB 68 (2003) 174304]
- Con estos valores, $J \gg$, $\chi \gg$ → polarón de Fröhlich → Aproximación continua → Polarobreathers poco probables.

Esquema de la charla

El modelo de Davydov–Scott (proteínas)

- Modelo introducido para el estudio de cambios conformacionales en proteínas.

El modelo de Davydov–Scott (proteínas)

- Modelo introducido para el estudio de cambios conformacionales en proteínas.
- Esqueleto de hélices α de proteínas:

$$\cdots H - N - C = O \cdots H - N - C = O \cdots H - N - C = O \cdots$$

El modelo de Davydov–Scott (proteínas)

- Modelo introducido para el estudio de cambios conformacionales en proteínas.
- Esqueleto de hélices α de proteínas:

$$\cdots H - N - C = O \cdots H - N - C = O \cdots H - N - C = O \cdots$$

- Ideas del modelo de Davydov [A.C. Scott. Phys. Rep. 217 (1992) 1]:

El modelo de Davydov–Scott (proteínas)

- Modelo introducido para el estudio de cambios conformacionales en proteínas.
- Esqueleto de hélices α de proteínas:

$$\cdots H - N - C = O \cdots H - N - C = O \cdots H - N - C = O \cdots$$

- Ideas del modelo de Davydov [A.C. Scott. Phys. Rep. 217 (1992) 1]:
  - Se crea un excitón en el grupo amido I $C = O$ (hidrólisis de ATP, medicamento).

El modelo de Davydov–Scott (proteínas)

- Modelo introducido para el estudio de cambios conformacionales en proteínas.
- Esqueleto de hélices α de proteínas:

$$\cdots H - N - C = O \cdots H - N - C = O \cdots H - N - C = O \cdots$$

- Ideas del modelo de Davydov [A.C. Scott. Phys. Rep. 217 (1992) 1]:
  - Se crea un excitón en el grupo amido I $C = O$ (hidrólisis de ATP, medicamento).
  - Las grupos amido excitados interaccionan con los puentes de hidrógeno $\cdots$.

El modelo de Davydov–Scott (proteínas)

- Modelo introducido para el estudio de cambios conformacionales en proteínas.
- Esqueleto de hélices α de proteínas:

$$\cdots H - N - C = O \cdots H - N - C = O \cdots H - N - C = O \cdots$$

- Ideas del modelo de Davydov [A.C. Scott. Phys. Rep. 217 (1992) 1]:
  - Se crea un excitón en el grupo amido I $C = O$ (hidrólisis de ATP, medicamento).
  - Las grupos amido excitados interaccionan con los puentes de hidrógeno $\cdots$.
  - Solitón de Davydov: Excitón + distorsión puentes de hidrógeno. → Polarón

El modelo de Davydov–Scott (proteínas)

- Modelo introducido para el estudio de cambios conformacionales en proteínas.
- Esqueleto de hélices α de proteínas:

$$\cdots H - N - C = O \cdots H - N - C = O \cdots H - N - C = O \cdots$$

- Ideas del modelo de Davydov [A.C. Scott. Phys. Rep. 217 (1992) 1]:
  - Se crea un excitón en el grupo amido I $C = O$ (hidrólisis de ATP, medicamento).
  - Las grupos amido excitados interaccionan con los puentes de hidrógeno $\cdots$.
  - Solitón de Davydov: Excitón + distorsión puentes de hidrógeno. → Polarón
- A diferencia del modelo de Holstein, el espectro de modos lineales es acústico, por lo que no pueden existir polarobreathers.

Esquema de la charla

1. Breathers
2. Polarones
3. Polarobreathers
4. ¿Aplicaciones biológicas?
   - El modelo de Peyrard–Bishop
   - El modelo de Davydov–Scott
5. Conclusiones

Conclusiones

- Polarones → Estados ligados excitón + fonón

Conclusiones

- Polarones → Estados ligados excitón + fonón
- Polarobreathers → Estados ligados excitón + breather

Conclusiones

- Polarones → Estados ligados excitón + fonón
- Polarobreathers → Estados ligados excitón + breather
  - Existen si ningún múltiplo entero de la frecuencia del polarobreather coincide con las frecuencias de los modos lineales.

Conclusiones

- Polarones → Estados ligados excitón + fonón
- Polarobreathers → Estados ligados excitón + breather
  - Existen si ningún múltiplo entero de la frecuencia del polarobreather coincide con las frecuencias de los modos lineales.
  - Son estables si la constante de acoplo excitón–red es negativa.

Conclusiones

- Polarones → Estados ligados excitón + fonón
- Polarobreathers → Estados ligados excitón + breather
  - Existen si ningún múltiplo entero de la frecuencia del polarobreather coincide con las frecuencias de los modos lineales.
  - Son estables si la constante de acoplo excitón–red es negativa.
  - El espectro de Fourier de u_n y $|\Psi_n|^2$ muestra varios picos correspondientes a cada uno de los armónicos.

Conclusiones

- Polarones → Estados ligados excitón + fonón
- Polarobreathers → Estados ligados excitón + breather
  - Existen si ningún múltiplo entero de la frecuencia del polarobreather coincide con las frecuencias de los modos lineales.
  - Son estables si la constante de acoplo excitón–red es negativa.
  - El espectro de Fourier de u_n y $|\Psi_n|^2$ muestra varios picos correspondientes a cada uno de los armónicos.
- Los polarobreathers podrían existir en el modelo de Peyrard–Bishop–Holstein para el ADN (aunque con parámetros no realistas).

Conclusiones

- Polarones → Estados ligados excitón + fonón
- Polarobreathers → Estados ligados excitón + breather
  - Existen si ningún múltiplo entero de la frecuencia del polarobreather coincide con las frecuencias de los modos lineales.
  - Son estables si la constante de acoplo excitón–red es negativa.
  - El espectro de Fourier de u_n y $|\Psi_n|^2$ muestra varios picos correspondientes a cada uno de los armónicos.
- Los polarobreathers podrían existir en el modelo de Peyrard–Bishop–Holstein para el ADN (aunque con parámetros no realistas).
- Los polarobreathers no pueden existir en el modelo de Davydov–Scott para proteínas.

Estudios futuros

- Potencial de Morse on–site y $\chi > 0 \leftrightarrow$ Bifurcaciones y la estabilidad de polarobreathers

Estudios futuros

- Potencial de Morse on–site y $\chi > 0 \leftrightarrow$ Bifurcaciones y la estabilidad de polarobreathers
- Otros potenciales on–site (ϕ^4 duro y blando, sine-Gordon).

Estudios futuros

- Potencial de Morse on–site y $\chi > 0 \leftrightarrow$ Bifurcaciones y la estabilidad de polarobreathers
- Otros potenciales on–site (ϕ^4 duro y blando, sine-Gordon).
- Existencia de polarobreathers en el modelo de Peyrard–Bishop–Dauxois–Holstein:

$$W(u_n, u_{n-1}) = \frac{k}{2}\left[1 + \rho \mathrm{e}^{-\beta(u_n + u_{n-1})}\right](u_n - u_{n-1})^2$$

Estudios futuros

- Potencial de Morse on–site y $\chi > 0 \leftrightarrow$ Bifurcaciones y la estabilidad de polarobreathers
- Otros potenciales on–site (ϕ^4 duro y blando, sine-Gordon).
- Existencia de polarobreathers en el modelo de Peyrard–Bishop–Dauxois–Holstein:

$$W(u_n, u_{n-1}) = \frac{k}{2}\left[1 + \rho \mathrm{e}^{-\beta(u_n + u_{n-1})}\right](u_n - u_{n-1})^2$$

- Polarobreathers en acetinilida (ACN)

Estudios futuros

- Potencial de Morse on–site y $\chi > 0 \leftrightarrow$ Bifurcaciones y la estabilidad de polarobreathers
- Otros potenciales on–site (ϕ^4 duro y blando, sine-Gordon).
- Existencia de polarobreathers en el modelo de Peyrard–Bishop–Dauxois–Holstein:

$$W(u_n, u_{n-1}) = \frac{k}{2}\left[1 + \rho e^{-\beta(u_n + u_{n-1})}\right](u_n - u_{n-1})^2$$

- Polarobreathers en acetinilida (ACN)
  - Polímero con estructura similar a proteínas

Estudios futuros

- Potencial de Morse on–site y $\chi > 0 \leftrightarrow$ Bifurcaciones y la estabilidad de polarobreathers
- Otros potenciales on–site (ϕ^4 duro y blando, sine-Gordon).
- Existencia de polarobreathers en el modelo de Peyrard–Bishop–Dauxois–Holstein:

$$W(u_n, u_{n-1}) = \frac{k}{2}\left[1 + \rho \mathrm{e}^{-\beta(u_n + u_{n-1})}\right](u_n - u_{n-1})^2$$

- Polarobreathers en acetinilida (ACN)
  - Polímero con estructura similar a proteínas
  - Fonones ópticos $\rightarrow$ Pueden existir polarobreathers

Gracias por su atención

Localized Excitations in Nonlinear Complex Systems (LENCOS)

Sevilla, 14-17 de Julio de 2009

http://aleph.eii.us.es/LENCOS